

Проблемой нашего проекта было рассмотреть магические кластеры и процесс их плавления. Интерес рассмотреть именно магические кластеры вызван их повышенной стабильностью, по сравнению с другими малыми кластерами. Создание графика плавления таких кластеров будет более ярко выражено и даст нам более глубокое понимание об изменении полной энергии атомов кластеров при их плавлении.

Стоит упомянуть, что такое кластеры. Кластер – объединение нескольких однородных элементов, которое может рассматриваться как самостоятельная единица, обладающая определёнными свойствами.

Данный термин можно повстречать в контексте многих сфер, начиная с информационных технологий и заканчивая музыкой.

В химии, кластерами называют химические соединения, являющиеся промежуточными между молекулой и объемным твердым телом. Кластеры могут иметь различную стехиометрию и геометрическую структуру.

Перед нами стояли следующие задачи:

1. Взять кластеры с «магическим» числом атомов 7 и 19.
2. Исследовать в двумерной модели плавление этих малых кластеров.
3. Проследить за изменениями энергии атомов кластеров при изменении температуры, используя для этого соответствующие формулы.
4. Составить график изменений зависимости средней температуры от полной энергии одного атома.

Для того, чтобы изучить проблему и решить поставленные задачи, мы реализовали алгоритм, суть которого заключается в том, что необходимо вывести зависимость кинетической энергии магических кластеров от температуры при нагревании до точки плавления. Данный алгоритм мы реализовали на языке программирования Python.

Подготовительный этап:

В основу программы легла формула:

$$\sum E_k = T \cdot (2 \cdot N - 3) \cdot k^2,$$

где T – температура, N – число атомов в кластере, $k = 1,380649 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана.

При написании кода есть возможность использовать массив, сумму кинетической энергии заменяем на просто кинетическую энергию, т. к. каждому элементу массива будет соответствовать своя кинетическая энергия.

Программа была реализована по следующему сценарию:

1. Подключили необходимые библиотеки;
2. Ввели условия для температуры (задали массив от 1000 до 2348 с шагом 10);

3. Ввели 2 переменные, отвечающие за количество атомов в кластерах;
4. Создали функцию для подсчета кинетической энергии. В качестве аргументов взяли количество атомов и температуру;
5. Создали 2 массива, в которые поместили полученные значения функции;

Код программы:

```
import math

import matplotlib.pyplot as plt

t0 = 1000

tmax = 2348

dt = 10

t = np.arange(t0, tmax, dt)

N1 = 7

N2 = 19

def Ek(N, t):

    ek = (t*(2*N-3) * 1.380649*pow (10, -23))/2

    return ek

e1 = Ek(N1, t)

e2 = Ek(N2, t)

plt.plot(t, e1)

plt.plot(t, e2)
```

С помощью программы построили модель зависимости кинетической энергии магических кластеров от температуры при нагревании до точки плавления.

Получились следующие графики:

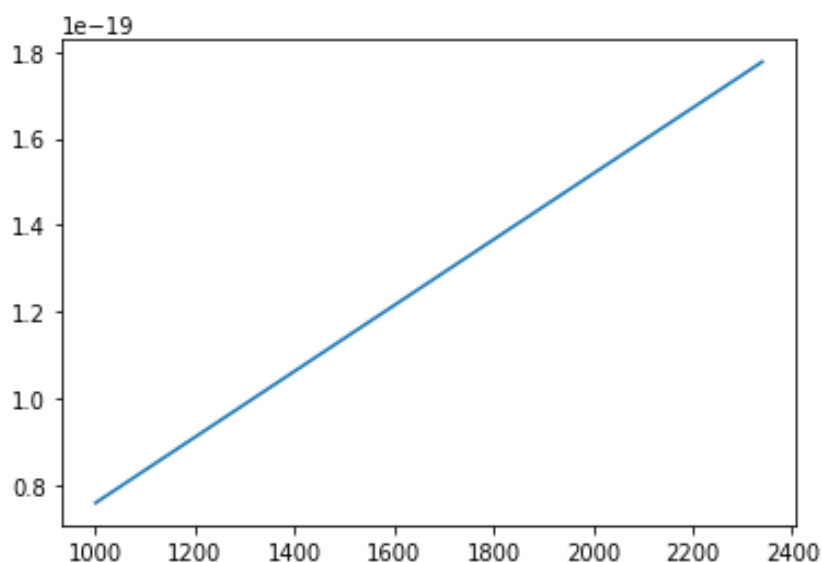


Рис. 1. Для кластера с числом атомов, равным 7

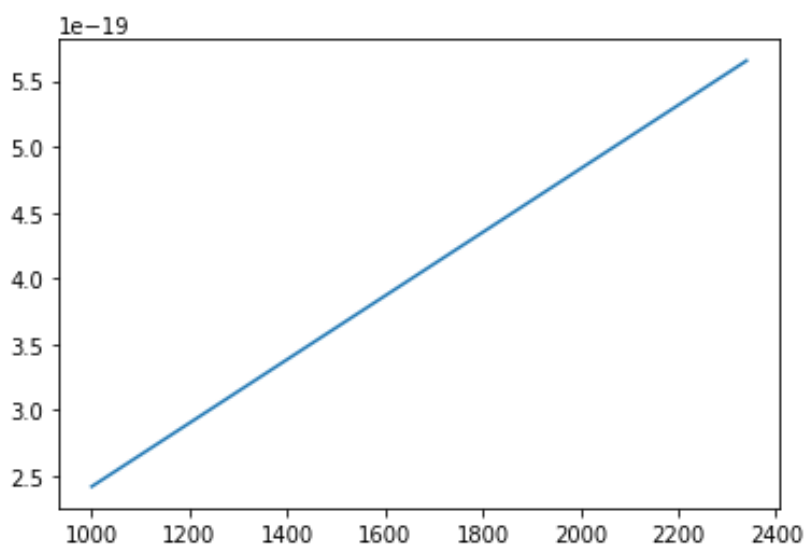


Рис. 2. Для кластера с числом атомов, равным 19

Построенные графики помогли нам выявить, что кинетическая энергия прямо пропорциональна температуре, т. к. получена линейная функция. Также видим, что при нагреве кинетическая энергия кластеров увеличивается. Для кластера с числом атомов, равным 7, энергия составит $1,8 \cdot 10^{-19}$ Дж, а для кластера с числом атомов, равным 19, – $5,7 \cdot 10^{-19}$ Дж.

Подводя итоги хочется сказать, что нами были рассмотрены магические кластеры и процесс их плавления. Для анализа кластеров мы реализовали алгоритм на языке Python и с его помощью построили графики. Графики помогли нам наглядно убедиться в том, что при нагреве кинетическая энергия кластеров увеличивается.

